

学校编码: 10384
学 号: 200231033

分类号_____密级_____
UDC _____

厦 门 大 学
博 士 学 位 论 文

基于机群平台的陶瓷晶粒生长仿真

Simulation of Ceramic Grain Growth Based on
Network of Workstation

刘宗曦

指导教师姓名: 吉 国 力 教 授

专 业 名 称: 1.1.1.1.1 系
统 工 程

论文提交日期: 2005 年 7 月

论文答辩时间: 2005 年 8 月

学位授予日期: 2005 年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2005 年 7 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的
研究成果。本人在论文写作中参考的个人或集体的研究成
果，均在文中以明确方式标明。本人依法享受和承担由此
论文而产生的权利和责任。

声明人（签名）：**刘宗曦**

年 月 日

摘 要

本文以项目组承担的福建省自然科学基金项目“陶瓷材料微观演化模型与仿真应用研究”的前期工作为基础,针对原子线度的陶瓷晶粒生长仿真环境、仿真算法及其表现形式的研究所存在的不足^[19],进一步从晶粒生长方式及算法改进方面展开工作。

在仿真环境方面,采用机群方式和并行设计的 PCAM 技术,开发实现了陶瓷晶粒的三维并行仿真平台,在此平台下对三维串行仿真算法进行并行化设计^[19],有效地实现了陶瓷晶粒原子线度的作业级(程序级)并行仿真。在此基础上提出了一种空间分割方法,对算法进行了改进,实验表明改进算法在计算量较大时仿真速度有明显改善。

论文由五章组成。第一章:绪论。对本文的项目背景和研究意义进行介绍,提出本文的研究方向。第二章:机群平台下的晶粒生长并行化设计与实现。建立机群的并行仿真平台,分析三维晶粒的串行仿真算法的特点,用 PCAM 技术为其在机群平台下设计可行的并行仿真算法。第三章:基于空间分割的晶粒生长算法设计与实现。提出了一种基于空间分割的改进算法,验证了同等规模下改进算法速度更快的优点,并将其应用于并行平台下。第四章:机群生长平台下的实验结果分析。在机群平台下进行实验,获得实验数据进行分析。第五章:结论与展望。总结仿真工作的阶段性成果,并提出仿真模型的不足和改进建议。

关键词: 晶粒生长; 并行算法; 机群系统

厦门大学博硕士论文摘要库

Abstract

Based on the research of Fujian Provincial Natural Science fund project Ceramic Grain Growth modeling and simulation, the thesis worked on the aspects of Simulation environment, algorithm and dynamic demonstration and put forward ways of algorithm optimization.

By utilizing the scheme of parallel algorithm based on network of workstation, the thesis set up a three-dimensional parallel simulation platform for Ceramic Grain Growth. Thus, the algorithm was designed under the process of PCAM techniques to realize the parallel simulation in process level. The space division techniques were also introduced in the thesis to optimize the algorithm.

The thesis contains five chapters. Chapter One, Introduction to the grain growth theory. Provide the background for ceramic grain growth theories and the research interests of the thesis. Chapter two, Research on grain growth under NOW platform. Describing the designing techniques of parallel algorithm and applying to ceramic grain growth algorithm based on NOW. Chapter three, Optimization of ceramic grain growth algorithm by space division techniques. Putting forward a new technique to optimize the algorithm and experiment its efficiency in the same calculation scale. Chapter four, Experiments and Analysis. Building simulation experiments for new algorithms and analyzing the different experiment datum. Chapter five, Conclusions and suggestions. Generalizing the thesis works by making conclusions and remarking on the possible optimizing ways in future.

Keywords: Ceramic grain growth; Parallel algorithm; NOW

厦门大学博硕士论文摘要库

目 录

第一章 绪论	1
1.1 课题背景及意义	1
1.2 国内外的研究历史及现状	2
1.2.1 计算机仿真研究的简单分类	2
1.2.2 国内外的研究成果	3
1.3 本文的研究内容	5
第二章 机群平台下的晶粒生长并行化设计与实现	7
2.1 三维串行生长方式存在的问题	7
2.1.1 Monte Carlo 仿真模型	7
2.1.2 ABO ₃ 型陶瓷的三维表现	8
2.2 机群并行平台的体系结构	15
2.3 三维串行仿真算法的并行化设计	18
2.3.1 并行任务划分	19
2.3.2 通信设计	23
2.3.3 任务组合与映射	31
2.4 机群生长平台的并行化实现	32
2.5 小结	34
第三章 基于空间分割的晶粒生长算法设计与实现	35
3.1 晶粒生长算法的不足	35
3.1.1 数据结构	36
3.1.2 存在问题	37
3.2 基于空间分割的晶粒生长算法	38

3.2.1 空间分割的设计思路	38
3.2.2 空间分割的算法设计	41
3.3 实验结果分析	47
3.4 小结	53
第四章 机群生长平台下的实验结果分析	55
4.1 实验结果与分析	55
4.2 仿真结果的图像输出	60
4.3 小结	61
第五章 结论与展望	62
5.1 研究工作总结	62
5.2 有待继续研究的问题	62
参考文献	64
致 谢	67

第一章 绪论

1.1 课题背景及意义

无机非金属材料是材料领域的一个大类，对人类的发展、社会的进步和人民生活水平的提高有重要作用。陶瓷是最重要的无机非金属材料，先进陶瓷材料则专指用精制高纯人工合成的无机化合物为原料，采用精密控制工艺成型烧结而制成的高性能陶瓷，以区别于用天然无机物烧结而成的传统陶瓷（如碗盆瓶杯等）。与金属或高分子材料相比，先进陶瓷材料更具众多独特的性能，如结构陶瓷优异的高温力学性能，功能陶瓷特有的光、声、电、磁、热或功能耦合效应是其他材料难以具备的。事实上，现代无机非金属材料已经在很多领域，特别是诸多高技术领域，获得关键性的应用。

无机材料是现代信息与通信技术的基础。大型集成电路中的各类陶瓷基片和衬底材料，光纤通信中的石英光纤等是整个信息产业中最为关键的材料。另外，光通信中有源器件中的激光工作物质、无源器件中光纤连接器用的氧化锆陶瓷材料等都是现代光通信领域内必不可少的关键材料。

国防军工领域中，陶瓷材料发挥了关键作用。战略导弹、军事卫星和导弹防御系统是满足现代和未来国家安全需要的“杀手锏”。战略导弹上的防热端头帽、各类卫星星体和箭体用防热温控涂层材料、火箭喷管碳 / 陶瓷梯度复合材料和导弹防御系统中的微波介质材料等等，均是先进陶瓷材料。

无机材料在环境保护中做出了贡献。废气的处理是环保的重要方面，将废气转化为无害的气体需要多孔或蜂窝状的陶瓷作为转化器的载体材

料或催化 / 载体一体化材料.其他各种高温吸附、分离和催化材料等也是先进陶瓷材料。清洁能源如太阳能、核能、燃料电池等，均离不开无机非金属材料。

无机材料为人类健康造福。疾病早期诊断采用的先进的医疗设备（如高分辨 B 超仪、高速 CT 和正电子断层扫描成像仪 PET 等）中最关键的探测材料，如超声波发射与探测材料、高能射线探测材料是陶瓷或晶体材料。人工关节、齿科材料等是一类具有生物活性的结构陶瓷材料。

以上情况可以看出，很多高技术产业和国防军工的发展在很大程度上要依赖包括陶瓷材料在内的无机材料技术的突破和发展才得以实现。国家对高技术和高技术产业的未来需求同样离不开材料的进一步发展。反过来，我国的高技术产业和国防军工的发展，无疑也向无机材料提出了新的更高要求。结构陶瓷将在国防军工、信息通讯、环保和传统产业改造中发挥越来越大的作用。

陶瓷材料的物理性能与其相应的微观结构之间存在着密切的相互联系，从陶瓷块体(约 10^{-3}m)、晶粒线度(通常约为 10^{-6}m)直至原子线度(约 10^{-10}m)都存在这种关系。与此相关的晶粒尺度、晶界、晶粒取向等都对物理性能有影响。深入了解微观结构与宏观性能的相互关系，将有助于陶瓷材料的开发与应用。在过去 50 多年中，许多学者从不同的角度研究了晶粒生长问题，用计算机进行晶粒生长的仿真研究也是当前热门的课题，它所属的计算材料科学领域是一门新兴学科，近年来在每年的国际材料研究学会年会上都有专门的分会场进行讨论。

1.2 国内外的研究历史及现状

1.2.1 计算机仿真研究的简单分类

根据研究角度，可以把晶粒生长的计算机仿真研究基本上分为三类：

生长动力学角度^[6]、统计学角度^{[17]、[18]}、拓扑学角度^[3]。生长动力学主要是从晶粒生长的驱动力，原子之间的相互作用力来进行仿真研究。统计学角度是从大量原子运动的统计性质进行研究，不是很具体的从单个原子研究能量，动力学的性质，而是从统计学的角度模拟晶粒边界的变化状况。拓扑学角度是从晶粒的几何性质进行仿真研究，仿真生长的过程就是晶粒几何结构演变的过程，对晶粒的物理，化学性质研究较少，基本上是一种纯数学的方法。

1.2.2 国内外的研究成果

目前国内外在晶粒生长的计算机仿真大多是从晶粒线度进行研究，即针对晶粒边界的迁移变化的宏观规律来进行分析和模拟。Potts 模型所谓的“晶粒的成员”，是指原子团，也不是真正意义上的原子线度模拟。而那些所谓的宏观规律，实际上是对微观粒子群体运动在统计上的描述，不是准确地记录，这些规律的深层机理也并不是已经完全了解，这些方法总有些不尽人意，所得到的仿真图形不够逼真，在晶粒交界处会出现异常的三角形状、“之字形”和“位错线”等情况。陶瓷的生长是在高温下平均晶粒大小随着边界原子的移动而增大的一个过程，这种晶粒长大的驱动力来源于原子从凸面晶粒位置移到凹面晶粒位置时所释放出的自由能，原因在于凹面位置的原子数更多，处于更稳定的低能态。从晶界的整体上看，晶界朝曲面中心移动，并且大晶粒吞没小晶粒而长得更大。

在 20 世纪 50 年代早期的一篇经典论文^[1] 中，Burke 和 Turnbull 推导了晶粒生长的抛物线规律，并提出了晶粒生长动力学的平方关系理论：

$$R_t = kt^{1/n}, n = 2 \quad (1-1)$$

式(1-1)中， R_t 是 t 时刻的平均晶粒尺寸， k 为常数， n 是晶粒生长指数。

n 常被称为晶粒生长指数。自从晶粒生长动力学的平方关系理论提出后，

学者们做了很多实验来获取晶粒生长指数,并把结果与理想的 $n=2$ 做了比较。经过区域提纯的材料(杂质浓度很低)的生长指数实验数据由表 1-1 给出。可以看出, n 的值在 2 到 4 之间变化, 平均值 2.5 ± 0.4 。它们大部分都是从分析微观结构的二维截面得出的。晶粒平均直径是通过找平均线性截距的方法得到。

表 1-1 区域提纯的材料的晶粒生长指数

金属(已提纯)	指数 n	来源
Al	4	P.Gordon ^[9]
Fe	2.5	H.Hu ^[10]
Pb	2.5	G.F.Bolling ^[11]
Pb	2.4	J.P.Drolet ^[11]
Sn	2.3	J.P.Drolet ^[11]
Sn	2	E.L.Holmes ^[12]

Martin 和 Doherty^[2]考察了区域提纯材料的晶粒生长指数。在他们看来, 有以下原因使得 $n>2$:

(I)溶解物阻碍引起 v 对 p 的非线性依赖(甚至对高纯度材料也是如此)。

或

(II)速度 $v = \mu(p - p_0)$ (1-2)

其中 p_0 为最小驱动力, 小于它迁移将不发生。Martin 和 Doherty^[2]倾向于后一种解释, 因为在晶粒生长过程中, 当驱动力不能满足再结晶的需要, 速度将保持在低的线性区域内。当然, 这个结论也是在假定纯净单相系统中 $n=2$ 的前提下。

1950 年代早期 C.S.Smith^[3]发表了一篇重要论文。他强调, 正常晶粒生长是由于拓扑学的空间填充条件和几何上的表面张力平衡相互作用的结

果，并列举了一系列拓扑条件。**Smith**是最先意识到拓扑学空间填充理论在晶粒生长研究中的重要意义的人之一，但他没有说明快速拓扑转换和全局晶粒生长怎样才能发生。与之相对，**Burke**和**Turnbull**研究了一个孤立球晶粒晶界迁移的动力学，但没有去研究晶粒连结成空间填充网络如何影响晶界移动。

Rhines和**Craig**^[4]在一篇已成为晶粒生长领域的经典之作的论文中提出，三维中收缩晶粒的体积定然被整个系统中的晶粒共享。同样，晶粒的拓扑参数变化如边、面、顶点数，也将传播到每个晶粒。大的晶粒成比例地比小的晶粒有更多的体积可以共享。**Rhines**和**Craig**引入了两个新概念：清除常数和构造梯度。

近几年来国内外学者则运用计算机仿真对晶粒的生长进行了大量的研究。**Stoyan**^[5]等用过建立随机嵌接组织数学模型进行体视学研究，**刘国权**^[16]等把体视学和蒙特卡罗方法相结合进行三维晶粒组织仿真研究。**Tikare V.**和**Miodownik M.A.**通过建立晶粒三维的蒙特卡罗仿真^[7]来研究晶粒的生长和气孔的移动。2002年，我们采用原子尺度的计算机模型来进行晶粒生长三维仿真来辅助分析，取得了一些成果^[15]。

1.3 本文的研究内容

项目“陶瓷材料微观演化模型与仿真应用研究”前期从原子尺度出发，根据 Monte Carlo 仿真方法建立 ABO_3 型陶瓷晶粒生长的三维仿真模型，并运用计算机实现了这一模型，得到了较为稳定的仿真软件。本文以此为基础，对陶瓷晶粒生长仿真三维串行模型进行分析，针对该模型运行方式的局限性及其速度慢、消耗资源大的不足之处提出相应的解决方案。本文做了以下主要工作：

- (1) 研究现有的陶瓷晶粒三维仿真模型的局限性及其他不足之处。

- (2) 建立机群仿真平台，以次为基础结合 PCAM 并行设计方法，设计了基于机群系统的三维晶粒并行生长算法，有效的陶瓷晶粒的作业级(程序级)并行生长。
- (3) 提出一种空间分割方法，将其应用于晶粒生长算法的改进。
- (4) 进行实验，比较改进算法、并行算法和串行算法之间的优缺点，并给出结论。

第二章 机群平台下的晶粒生长并行化设计与实现

2.1 三维串行生长方式存在的问题

2.1.1 Monte Carlo 仿真模型

Monte Carlo 仿真是一种随机的马尔可夫过程,随机产生一系列格点状态的构造。由随机的分配产生可能的状态,是否接受这种可能状态是根据由 Boltzman 因子而确定的概率来进行判断。Monte Carlo 过程的马尔可夫性质即无后效性是指转移到新状态的可能性仅由当前状态来决定。

要用 Monte Carlo 方法仿真三维结构的晶粒生长,首先要初始化仿真空间,把仿真空间切割成 Z 个厚度很小的薄层,然后把每个薄层均分成 $X*Y$ 个小立方体。假定一个晶格中包含 $N*N*N$ 个小立方体,用一个三维的矩阵表示。具有相同取向的临近格点组织在一起成为一个晶粒。为每个格点分配一个整数 $Q_i(1 < Q_i < Q)$,称为格点的取向。

当我们初始化了晶格,就可以开始 Monte Carlo 仿真过程了。用 Monte Carlo 方法仿真多晶材料的晶粒生长是通过估算一个格点的势能来进行的。某格点周围格点的相互作用决定了这个格点的势能。这种相互作用的哈密尔敦(Hamilton)函数公式如下:

$$E = -J \sum_{j=1}^n (\delta_{Q_i Q_j} - 1),$$

式中 J 是一个正数,表示待评价晶格 i 的近邻格点编号。 Q_i 是第 i 个晶格点的取向, Q_j 是第 j 个晶格点的取向。在三维情况下 $n=18$ 。

用于模拟单相结构的基本晶粒生长仿真算法描述如下:

- 1) 随机产生整数对 (x,y,z) , 其中 $0 < x < N-1, 0 < y < N-1, 0 < z < N-1$ 来确定

新的格点位置；

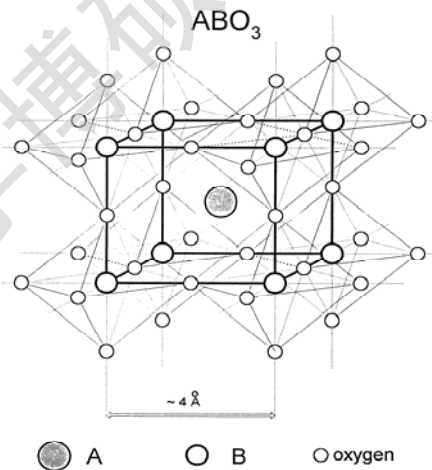
- 2) 根据式(2-7)来计算能量 E_1 ;
- 3) 为晶格点 I 随机分配一个已产生的取向;
- 4) 根据式(2-7)来计算晶格点 i 的新的能量 E_2 ;
- 5) 由下式计算重定向后格点 i 的能量变化 $\Delta E = E_2 - E_1$; 如果 $\Delta E \leq 0$, 说明格点 i 的能量降低, 则接受本次取向。如果 $\Delta E > 0$, 则要根据概率 P 来决定是否接受本次取向。 $P = \exp\{-\Delta E/kT\}$ 式中, k 是 Boltzman 常数, T 是温度而且 $\alpha = J/(kT)$ 被称为温度系数。

上述过程只代表一次重定向的尝试, 定义 $N*N*N$ 次重定向尝试为一个 Monte Carlo 步长(MCS), MCS 代表仿真的一个单位时间。

2.1.2 ABO₃ 型陶瓷的三维表现

下图为室温时 ABO₃ 型立方钙钛矿结构单元。

图 2-1-1 ABO₃ 型立方钙钛矿结构单元



ABO₃ 型立方钙钛矿结构 3 个有代表性的截面: 垂直晶胞表面(001)(如图 2-1-2 所示)、经过晶胞面对角线(110)(如图 2-1-3 所示)、经过晶胞体对

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库